

$$U(\tau) = \exp(-i\hbar^{-1}(H_r + H_t + V(r) + \Delta V(r, \theta))\tau)$$

Il est facile de montrer (voir par exemple l'article de Tsao et Curnutte cité dans les références générales, ou encore la référence (12)), que l'équation (III,13) peut s'écrire sous la forme bien connue :

$$\alpha(\omega) = k \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \int_0^T dt' \text{Trace} \left\{ \rho(0) \frac{\vec{\mu}(t') \vec{\mu}(t) - \vec{\mu}(t) \vec{\mu}(t')}{e^{i\omega(t-t')}} \right\} \times$$

ou

$$\alpha(\omega) = k \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \text{Trace} \left\{ \rho(0) \int_0^T e^{i\omega t} \vec{\mu}(t) dt \int_0^T e^{-i\omega t} \vec{\mu}^*(t) dt - \rho(0) \int_0^T e^{-i\omega t} \vec{\mu}^*(t) dt \int_0^T e^{i\omega t} \vec{\mu}(t) dt \right\}$$

soit

$$\alpha(\alpha) = k \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \sum_{\alpha' \xi'} (\alpha \xi | \rho(0) | \alpha' \xi') \left[\int_0^T dt e^{i\omega t} (\alpha \xi | \vec{\mu}(t) | \alpha' \xi') \times \int_0^T dt e^{-i\omega t} (\alpha' \xi' | \vec{\mu}^* | \alpha \xi) - \int_0^T dt e^{-i\omega t} (\alpha \xi | \vec{\mu} | \alpha' \xi') \times \int_0^T dt e^{i\omega t} (\alpha' \xi' | \vec{\mu} | \alpha \xi) \right]$$

Pour écrire cette équation, on a choisi $\rho(0)$ diagonal dans la base $\{|\alpha \xi\rangle\}$, ce qui revient à prendre un opérateur densité initial fonction de $H_r + H_t + V(r)$, par exemple la distribution canonique

$$\exp(-(H_r + H_t + V)/kT) / \text{Trace} \left\{ \exp(-(H_r + H_t + V)/kT) \right\}$$

Cette équation montre que l'absorption observée sur une onde électromagnétique de fréquence angulaire est attribuable aux composantes de Fourier de fréquence angulaire (ω) des diverses amplitudes de probabilité :

$$(\Psi_{\alpha \xi}(t) | \vec{\mu} | \Psi_{\alpha' \xi'}(t)) \quad (\text{III,14})$$

où $\Psi_{\alpha \xi}$ et $\Psi_{\alpha' \xi'}$ sont les états obtenus à partir de $|\alpha \xi\rangle$ et $|\alpha' \xi'\rangle$ par action de l'opérateur d'évolution

$$\exp(-i\hbar^{-1}(H_r + H_t + V + \Delta V)t)$$